弱い相互作用をもつBose 気体の最低エネルギー，— DPO 近似 —

阪大教授　西　山　敏　之

（３月15日受理）

§1.　まえがき

希薄Bose 気体の最低エネルギーの値は散乱長 a の関数としてLee - Huang - Yang[1], Beliaev[2], Hugenholtz - Pines[3]達によって与えられた。他方，高密度Bose 気体の弱い相互作用の場合については，Feenberg 達の CBF 法[4]がLieb - Liniger[5]の１次元の厳密解と一致する結果を与えることがわかっている。[6),7)] この結果は，Bogoliubov とZubarev（BZ）の密度変数の方法[8]で得られた結果と一致することがBerdahl とLee[9] によって示されたが，最近高橋氏[10]は１次元系の δ 一関数相互作用をもつ系と３次元荷電Bose 気体についてBerdahl とLee の証明は成り立たず，BZ は正しい展開項を与えないことを示した。ここでは，この差異が特殊なBose 系に固有のものではなく，BZ およびそれと同等な他の理論[11]の不備に基づく結果であり，この不備な点は著者ら[12]の密度位相演算子法（DOP）において，いままで見過されていたエネルギー項を取りいれることによって修正され得ることを示す。Fröhlich[13]の指摘をまつまでもなく厳密な意味では密度（または粒子数密度 ρ ）に正準共役な量は存在しない。それにもかかわらず，演算子の正しい順序を乱さないように注意すれば，高密度弱結合の場合には正しい最低エネルギーの値を求めることができる。

ここでは簡単のために，全粒子数の逆数 $1/N$ について１次の項までに話を限って，どのような修正が必要であるかを考えることにしよう。

§2.　運動エネルギーの $1/N$ 展開

Bose 系の場の演算子 $\psi^{+}(\mathbf{r})$，$\psi(\mathbf{r})$ を用いて運動エネルギーのハミルトニアンは，質

量Mとして

$$H = \frac{\hbar^2}{2M}\int \nabla\psi^+ \cdot \nabla\psi \, d\boldsymbol{r} \tag{2・1}$$

となる。粒子数密度$\rho = \psi^+\psi$ の期待値が正の部分空間では，位相演算子$\phi(\boldsymbol{r})$を

$$\left.\begin{aligned} &\psi^+(\boldsymbol{r}) = \rho^{1/2}(\boldsymbol{r})\,\chi^+(r), \quad \psi(\boldsymbol{r}) = \chi(\boldsymbol{r})\rho^{1/2}(\boldsymbol{r}) \\ &\chi(\boldsymbol{r}) = \exp[\,i\phi(\boldsymbol{r})/\hbar] \end{aligned}\right\} \tag{2・2}$$

によって与えると，(2・1) は

$$T = \int d\boldsymbol{r}\,[(M/2)\rho^{1/2}(\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{v}^2(\boldsymbol{r})\rho^{1/2}(\boldsymbol{r}) + (\hbar^2/2M)|\,\nabla\rho^{1/2}(\boldsymbol{r})\,|^2$$

$$+ (\hbar/2i)\{\rho^{1/2}(\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r})\cdot\nabla\rho^{1/2}(\boldsymbol{r}) - \nabla\rho^{1/2}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r})\rho^{1/2}(\boldsymbol{r})\}], \tag{2・3}$$

となる。ここで $\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r})$ は量子流体力学の速度に相当する量であるが，もっと正確にはコヒーレント表示における位相差演算子[14]と考えるべき量である。$\phi(\boldsymbol{r})$ を用いて表わすと

$$\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}) = \nabla\phi(\boldsymbol{r})/M \tag{2・4}$$

である。ハミルトニアン (2・3) はBZ から Chan-Valatin の変換[15]によって得られるエルミット形のハミルトニアン，または Berdahl が用いたハミルトニアン，または砂川氏達のハミルトニアンと異なっている。この相異がまえがきで述べたエネルギーの相異と密接に関係している。ここで$\rho(\boldsymbol{r})$と$\phi(\boldsymbol{r})$のフーリェ変換

$$\left.\begin{aligned} &\rho_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\int\rho(\boldsymbol{r})\exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r}, \\ &\phi_k = \frac{\sqrt{N}}{V}\int\phi(\boldsymbol{r})\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r} \end{aligned}\right\} \tag{2・5}$$

を用いて，1/N をあらわに含む項まで求めると

$$T = T_{MPO} + T^1, \quad T_{MPO} = T_2 + H_3 + H_4 \tag{2・6}$$

$$T_2 = \frac{1}{2M}\sum_{\boldsymbol{k}} k^2\left(\phi_{\boldsymbol{k}}\phi_{-\boldsymbol{k}} + \frac{\hbar^2}{4}\rho_{\boldsymbol{k}}\rho_{-\boldsymbol{k}} - \frac{\hbar^2}{2}\right) \tag{2・7}$$

$$H_3 = \frac{-1}{2M\sqrt{N}} \sum_{k,l\neq0} (k\cdot l)\, \rho_{k+l} \left(\phi_k\phi_l - \frac{\hbar^2}{4}\rho_{-k}\rho_{-l} \right) \tag{2·8}$$

$$H_4 = -\frac{\hbar^2}{8MN} \sum_{k,l,m\neq0} (k\cdot l)\, \rho_k\rho_l\rho_m\rho_{-k-l-m} \tag{2·9}$$

$$T^1 = -\frac{\hbar^2}{8MN} \sum_{k,l} (k\cdot l)(1-\rho_k\rho_{-k}-\rho_l\rho_{-l}) \tag{2·10}$$

を得る。(2·9)は都築[16]とRajagopal-Grest[17]によって計算されたハミルトニアンであり，今迄見過されていた(2·10)の期待値は発散し0にはならない。(2·8)と(2·9)と(2·10)の和を摂動項としてひとまとめにして取り扱うとエネルギー期待値は収束し，CBFと同じ正しいエネルギーが得られる。

§ 3.　H_4の期待値

非摂動ハミルトニアンH_0はBZと同様に相互作用ポテンシャルのフーリェ係数をV_kと書いて

$$H_0 = T_2 + \frac{N}{2}\sum_k V_k(\rho_k\rho_{-k}-1) \tag{3·1}$$

で与えられ，フォノンの生成消滅演算子B_k^+，B_kを用いると

$$\left.\begin{aligned} H_0 &= \sum_k \varepsilon_k^B B_k^+ B_k + E_0^B, \quad \varepsilon_k^B = \hbar^2 k^2/(2M\lambda_k) \\ E_0^B &= -(\hbar^2/8M)\sum_k k^2(1-1/\lambda_k)^2 + (1/2)N^2V_0 \end{aligned}\right\} \tag{3·2}$$

となる。ここで

$$\rho_k = \sqrt{\lambda_k}(B_{-k}^+ + B_k), \quad \phi_k = \frac{i\hbar}{2\sqrt{\lambda_k}}(B_k^+ - B_{-k}) \tag{3·3}$$

とおいた。λ_kはBZの構造因子でV_kを用いて表わすと$(\hbar^2k^2/2M)^{1/2}/\{(\hbar^2k^2/2M)+2NV_k\}^{1/2}$となる。

(2·9)の対角要素E_4は，(2·9)がk, l, mについて対称であることに注意すると次のように書き表わされる。

$$\mathrm{E}_4 = \frac{\hbar^2}{16\mathrm{MN}} \sum_{k,l} (k^2 + l^2)\, \lambda_k \lambda_l$$

$$= \frac{\hbar^2}{48\mathrm{MN}} \sum_{k,l,m} \delta_{k+l+m,0} \left\{ (m^2 \lambda_k \lambda_l + l^2 \lambda_l \lambda_m + k^2 \lambda_m \lambda_k) \right.$$

$$\left. - 2\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{l}\, \lambda_k \lambda_l - 2\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{m}\, \lambda_l \lambda_m - 2\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{k}\, \lambda_m \lambda_k) \right\} \qquad (3\cdot4)$$

(3･4)の右辺の第4，5，6項はBerdahl によって0とみなされたものであるが，この発散項は(2･10)の期待値E_0^1と加え合わすことにより

$$\mathrm{E}_4^1 = \mathrm{E}_4 + \mathrm{E}_0^1 = \frac{\hbar^2}{48\mathrm{MN}} \sum_{k,l,m} \delta_{k+l+m,0} (k^2 \lambda_k \lambda_l + l^2 \lambda_l \lambda_m + m^2 \lambda_m \lambda_k)$$

$$- \frac{\hbar^2}{24\mathrm{MN}} \sum_{k,l,m} \delta_{k+l+m,0} \left\{ (\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{l}(1-\lambda_k)(1-\lambda_l) + \boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{m}(1-\lambda_l)(1-\lambda_m) \right.$$

$$\left. + \boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{k}\,(1-\lambda_m)(1-\lambda_k)) \right\} \qquad (3\cdot5)$$

となる。この2番目の総和は1次元Bose系では$V_k = 2C$とおくと[10)]

$$\varDelta \mathrm{E}_0^{\mathrm{BZ}} = \mathrm{N}C^2/12, \quad (\hbar = 2\mathrm{M} = 1) \qquad (3\cdot6)$$

となって，丁度BZとCBFのエネルギー差を与える項にほかならない。また，(3･5)の1番目の総和をH_3の2次の摂動エネルギーに加えることにより

$$\mathrm{E}_{02}^{\mathrm{B}} = -\frac{\hbar^2}{48\mathrm{MN}} \sum_{k,l,m} \delta_{k+l+m,0}\, \lambda_k \lambda_l \lambda_m \left\{ \frac{|\mathrm{A}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{l},\boldsymbol{m})|^2}{\mathrm{B}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{l},\boldsymbol{m})} - \mathrm{B}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}) \right\} \qquad (3\cdot7)$$

$$\mathrm{A}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}) = \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{l}(1+\lambda_k \lambda_l)\lambda_m + l\cdot m(1+\lambda_l \lambda_m)\lambda_k + \boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{k}(1+\lambda_m \lambda_k)\lambda_l \qquad (3\cdot8)$$

$$\mathrm{B}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}) = k^2 \lambda_l \lambda_m + l^2 \lambda_m \lambda_k + m^2 \lambda_k \lambda_l \qquad (3\cdot9)$$

註．都築氏によれば，(3･4)は，(2･9)式から，$\boldsymbol{k}$，$\boldsymbol{l}$，$\boldsymbol{m}$，$-\boldsymbol{k}-\boldsymbol{l}-\boldsymbol{m}$の4対の伝播ベクトルについて対称比してから対角要素を求めることにより間違いなく導かれる。すなわち(2･9)の代わりに次のように対称化したものを用いる。

$$\mathrm{H}_4 = +\frac{\hbar^2}{48\mathrm{MN}} \sum_{k,l,m}{}' (k^2 + l^2 + m^2 + \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{l} + \boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{m} + \boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{k})\, \rho_k \rho_l \rho_m \rho_{-k-l-m}$$

を得る。この式はRajagopalとGrestが求めた最低エネルギーの補正項である。

§4　最低エネルギーの式

BerdahlとLeeは，$\varDelta E_0^{BZ}$，すなわち(3・5)の第2番目の総和を無視して，$E_0^B+E_{02}^B \equiv E_0^{CBF}$を証明したが，$\varDelta E_0^{BZ}$を無視することはできないことがわかった以上，最低エネルギーの値は，*DPO*を用いたときには，次の総和式

$$E_0^{DPO} = E_0^B + E_{02}^B + \varDelta E_0^{BZ} \tag{3・10}$$

を計算しなければならない。$k^2 = -\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{l}+\boldsymbol{m})$などを用いて

$$C(\boldsymbol{k},\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}) = A(\boldsymbol{k},\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}) + B(\boldsymbol{k},\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}) \tag{3・11}$$

$$= \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{l}(1-\lambda_k)(1-\lambda_l)\lambda_m + \boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{m}(1-\lambda_l)(1-\lambda_m)\lambda_k + \boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{k}(1-\lambda_m)(1-\lambda_k)\lambda_l \tag{3・12}$$

を定義すると，(3・10)は次のように書き直される。

$$E_0^{DPO} = E_0^a + E_0^b \tag{3・13}$$

$$E_0^a = -\frac{\hbar^2}{48MN}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}} \delta_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{l}+\boldsymbol{m},0} \left| C(\boldsymbol{k},\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}) \right|^2 / B(\boldsymbol{k},\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}) \tag{3・14}$$

$$E_0^b = \frac{\hbar^2}{24MN}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}} \delta_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{l}+\boldsymbol{m},0}\, C(\boldsymbol{k},\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}) + \varDelta E_0^{BZ}$$

$$= \frac{\hbar^2}{16MN}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}} k^2(1-\lambda_k)(1-\lambda_l)(1-\lambda_m)\,\delta_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{l}+\boldsymbol{m},0} \tag{3・15}$$

これはLee[18]が，CBFによって導いたエネルギーの式と完全に一致している。

§5　結　　び

以上のように*DPO*において，演算子の正しい順序を保ちながら計算すれば，*BZ*とは異なり，*CBF*と一致する最低エネルギーを求めることができる。このとき密度と正準共役な演算子$\phi(\boldsymbol{r})$の存在を仮定した。高密度，弱結合の極限では正しいエネルギーの表式が得られたことから，低密度Bose気体ではこの仮定が許されない可能性は十分あるが，

すくなくとも1次元系で，Lieb-Liniger のパラメーター $\delta=C/\rho$ の小さい値に対してはこの仮定が成り立つと考えてよいことがわかった。(2・9)式を伝播ベクトルに関する対称性を無視して計算すると間違った結果がでる場合がある。このような結果には，摂動エネルギーが $V_k=0$ の理想気体についても0にならないような発散級数が現われるので，その誤りを判別することができる。

参考文献

1) T. D. Lee, K. Huang, and C. N. Yang, Phys. Rev. **106** (1957), 1135.
2) S. T. Beliaev, Sov. Phys. JETP **7** (1958), 289 ; 299.
3) N. H. Hugenholtz and D. Pines, Phys. Rev. **116** (1959), 489.
4) H. W. Jackson and E. Feenberg, Rev. Mod. Phys. **34** (1962), 686 ; E. Feenberg, **Theory of Quantum Fluids** (Academic Press, 1969).
5) E. H. Lieb and W. Liniger, Phys. Rev. **130** (1963), 1605.
6) F. J. Lee and D. K. Lee, Phys. Rev. **A9** (1974), 1408.
7) M. Takahashi, Prog. Theor. Phys. 53 (1975), No. 2.
8) N. N. Bogliubov and D. N. Zubarev, Sov. Phys. JETP **1** (1955), 83.
9) P. Berdahl and D. K. Lee, Phys. Rev. **A7** (1973), 1376.
10) M. Takahashi, private communication.
11) P. Berdahl, Ph. D. Thesis, (Stanford Univ. 1972) ; S. Sunakawa, S. Yamasaki, and T. Kebukawa, Prog. Theor. Phys. **41** (1969), 919.
12) T. Nishiyama, Prog. Theor. Phys. **7** (1952), 417 ; **8** (1952), 655 ; a preprint ; P. R. Zilzel, **The Many-Body Problem**, (Interscience Pub. 1963).
13) H. Fröhlich, Physica **34** (1967), 47 ; S. Nakajima and D. Yoshioka, Prog. Theor. Phys. **52** (1974), 733.
14) P. Carrutheks and M. M. Nieto, Rev. Mod. Phys. **40** (1968), 411.
15) H. M. Chan and J. G. Valatin, Nuovo Cimento (X) **19** (1961), 118.
16) T. Tsuzuki, Prog. Theor. Phys. 52 (1974), 793.
17) A. K. Rajagopal and G. S. Grest, Phys. Rev. A**10** (1974), 1837.
18) D. K. Lee, Phys. Rev. A**4** (1971), 1670.